

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 1993/94

Oktober/November 1993

ZSC 548/4 - Analisa Struktur Sinar-X

Masa : [3 jam]

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi LIMA muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab EMPAT soalan sahaja.

Kesemuanya wajib dijawab di dalam Bahasa Malaysia.

1. (a) Tuliskan nota-nota pendek tentang

- (i) Kelas hablur
- (ii) Kekisi Bravais
- (iii) Kumpulan titik, dan
- (iv) Kumpulan ruang

(40/100)

(b) Takrifkan faktor struktur dan terbitkan daripadanya ketidakan sistematik bagi kekisi berpusat-C. Berikan syarat-syarat had bagi

- (i) kekisi berpusat-F
- (ii) kekisi berpusat-I
- (iii) paksi-skru dan
- (iv) satah-gelangsar

(60/100)

2. (a) Bincangkan kaedah fotografi Weissenberg, kaedah fotografi Liukan dan kaedah fotografi de Jong. Titikberatkan faedah-faedah dan had-had setiap kaedah itu.

(50/100)

(b) Fotografi osilasi am sesuatu hablur ortorombik yang diputarakan terhadap paksi a, b dan c, satu demi satu, mempunyai perulangan garis-lapisan di antara paras sifar dan pertama yang bernilai masing-masing 5.07 mm, 7.74 mm dan 9.43 mm. Jika  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$  dan jejari kamera Weissenberg,  $R = 30.0 \text{ mm}$ , hitungkan nilai a, b dan c bagi sel-unit ortorombik itu.

Terangkan bagaimana pantulan 146 tidak dapat direkodkan bagi kes ini.

2. (b) Apa simetri yang boleh didapati daripada tiga fotograf osilasi itu?  
Adakah simetri yang didapati memastikan hablur ini adalah jenis ortorombik?  
(50/100)

3. (a) Terangkan bagaimana struktur bagi sesuatu hablur sederhana semacam NaCl dapat ditentukan.  
(50/100)

- (b) Potassium hexachloroplatinat (IV),  $K_2[PtCl_6]$ , adalah kubik dengan  $a = 9.755 \text{ \AA}$ . Kedudukan atomik adalah seperti di bawah:

$$(Z=4) : \{(0,0,0); (0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}); (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}); (\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)\} +$$

$$4 \text{ Pt} : (0,0,0)$$

$$8 \text{ K} : (\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}); (\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})$$

$$24 \text{ Cl} : \pm[(x,0,0); (0,x,0); (0,0,x)]$$

Tunjukkan bahawa  $F_c(hhh) = A'(hhh)$  di mana

$$A'(hhh) = 4g_{pt} + 8g_k \cos(3\pi h/2) + 24g_{cl} \cos(2\pi hx_{cl})$$

Hitungkan  $|F_c(hhh)|$  bagi nilai  $h$  yang dijadualkan di bawah dengan  $x_{cl} = 0.23$  dan  $0.24$ . Dapatkan faktor-faktor-R bagi  $|F_c|$  yang terskel bagi dua nilai  $x_{cl}$  ini dan tunjukkan yang mana nilai  $x_{cl}$  ini adalah lebih berpatutan.

hkl	111	222	333
$ F_o $	491	223	281
$g_{pt}$	73.5	66.5	59.5
$g_k$	17.5	14.5	12.0
$g_{cl}$	15.5	13.0	10.5

(50/100)

4. (a) Jelaskan kaedah penentuan struktur melalui fungsi Patterson. Bandingkan kaedah Patterson dengan kaedah terus.

(40/100)

4. (b) Diphenyl sulfoxide,  $(C_6H_5)_2SO$ , adalah monoklinik dengan  $a = 8.90 \text{ \AA}$ ,  $b = 14.08 \text{ \AA}$ ,  $c = 8.32 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 101.12^\circ$  dan  $Z = 4$ . Syarat-syarat had bagi pantulan sinar-x adalah:

hkl : tiada  
 h0l :  $h+l = 2n$   
 0k0 :  $k = 2n$

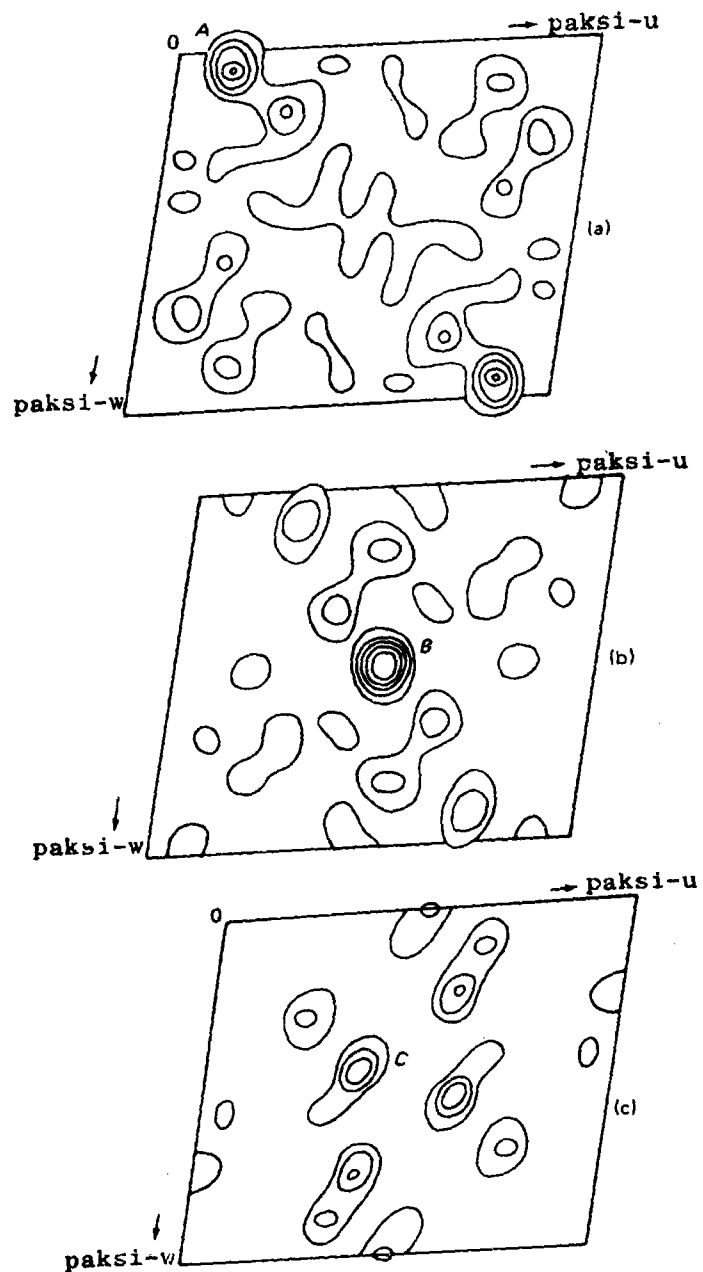
- (i) Dapatkan kumpulan ruang.
- (ii) Rajah-raja di bawah adalah keratan-keratan Patterson pada  $v = \frac{1}{2}$ ,  $v = 0.092$  dan  $v = 0.408$  masing-masing dan mengandungi puncak-puncak vektor S-S. Dapatkan posisi-posisi yang terbaik bagi atom S di sel unit.

Posisi-posisi am bagi kumpulan ruang diphenyl sulfoxide ialah:

$(x, y, z); (\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-y);$   
 $(-x, -y, -z); (\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$

.../4-

4. (b) (ii)



Keratan-keratan Patterson pada (a)  $v = \frac{1}{2}$ ,  
 (b)  $v = 0.092$  dan (c)  $v = 0.408$ .

(60/100)

...5/-

5. (a) Perihalkan kamera Debye-Scherrer dan bagaimana pantulan-pantulan sampel berhablur serbuk dapat direkodkan. Jelaskan bagaimana penghitungan perulangan-d sesuatu sampel berhablur serbuk didapati melalui fotografi Debye-Scherrer. Apakah kuasa pembezaan bagi kaedah serbuk?

(50/100)

- (b) Perihalkan kaedah Rietveld bagi penghalusan struktur. Bandingkan kaedah Rietveld dan kaedah penentuan struktur melalui hablur tunggal.

(50/100)

- oooOooo -